

Н.Г.КОКОДИЙ, доктор физ.-мат. наук, профессор, НФаУ, г. Харьков
Н.Н.ТИМЧЕНКО, канд. биол. наук, доцент, ХНТУСХ, г. Харьков
Л.Г.ЗАЙЦЕВА, ст. преподаватель, ХНТУСХ, г. Харьков
Е.Ю.НИКОЛАЕВА, инженер, ХНТУСХ, г. Харьков

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАССЕЯНИЯ СВЕТА НА МАЛЫХ ЧАСТИЦАХ

Обробка експериментальних даних вимірювання оптичними методами розмірів твердих і рідких частинок, які знаходяться в деякому середовищі, проводилась за допомогою дослідництва залежності інтенсивності випромінювання, яке пройшло через середовище, що містить ці частини, від довжини хвилі. Досліджуються можливості проведення розрахунків за спрощеними формулами для фактору ефективності послаблення Q .

Обработка экспериментальных данных измерения оптическими методами размеров твердых и жидких частиц, находящихся в некоторой среде, проводилась с помощью исследования зависимости интенсивности излучения, прошедшего через среду, содержащую эти частицы, от длины волны. Исследуются возможности произведения расчетов по упрощенным формулам для фактора эффективности ослабления Q .

При решении многих задач физики, химии, биологии, экологии необходимо уметь определять размеры и оптические свойства твердых или жидких частиц, находящихся в некоторой среде. К настоящему времени разработано множество методов решения таких задач – методы микроскопии [1], седиментации [2], фотоседиментации [3] и др.

Наиболее распространены оптические методы. На исследуемый объем, содержащий твердые и жидкие частицы, направляется пучок оптического излучения, и фотоприемником регистрируются параметры прошедшего или рассеянного света: его интенсивность, фаза, поляризация. После математической обработки сигнала с фотоприемника делается заключение о параметрах исследуемых частиц [4-6]. Методы определения параметров частиц по виду оптических измерений можно разделить на две большие группы. В одной из них измеряется форма индикатрисы рассеянного частицами излучения, в другой – исследуется зависимость интенсивности излучения, прошедшего через среду, содержащую эти частицы, от длины волны.

Каждый из этих методов имеет свои достоинства и недостатки. Далее будет рассматриваться второй из этих методов. Достоинствами его является меньшая чувствительность к форме частиц, чем у методов, связанных с измерением индикатрисы рассеяния, и возможность измерять размеры очень малых частиц (радиусом до 10 нм). Требования к максимальной концентрации частиц здесь также не очень жесткие. Они связаны с применимостью закона Бугера. Согласно этому закону интенсивность света I , прошедшего через среду, содержащую поглощающие и рассеивающие частицы, равна

$$I = I_0 e^{-\alpha l}, \quad (1)$$

где I_0 - интенсивность подающего света, l - толщина слоя, содержащего частицы, α - коэффициент ослабления. Метод может использоваться, если $\alpha l \ll 1$.

Если среда содержит N одинаковых частиц в единице объема, то при пренебрежении влиянием многократного рассеяния излучения внутри среды коэффициент ослабления определяется так:

$$\alpha(r, m, N, \lambda) = NQ(r, m, \lambda)\pi r^2, \quad (2)$$

где Q - фактор эффективности ослабления (параметр, часто используемый в теории рассеяния света [7,8]). Коэффициент ослабления зависит от размеров частиц r , их комплексного показателя преломления $m = n - ik$ и длины волны λ .

Если распределение частиц по размерам описывается функцией распределения $f(r)$, то

$$\alpha(r, m, \lambda) = \int_0^{\infty} Q(r, m, \lambda)\pi r^2 f(r) dr. \quad (3)$$

Измерив зависимость коэффициента ослабления от длины волны и зная вид функции $Q(r, m, \lambda)$, по формуле (2) можно найти средний размер частиц, а по формуле (3) – функцию распределения их по размерам и показатель преломления.

Вид формул для фактора эффективности ослабления Q зависит от формы частиц. В большинстве случаев на практике используются формулы для сферических частиц. Это оправдано тем, что форма малых жидких частиц близка к сферической, а характеристики рассеяния системы хаотически расположенных твердых частиц неправильной формы близки к характеристикам рассеяния системы сферических частиц.

Исследовалась зависимость от длины волны коэффициента ослабления водной эмульсии эфирных масел, использующихся в парфюмерии. В эксперименте с помощью спектрофотометра измерялся коэффициент пропускания кюветы с эмульсией, а коэффициент ослабления вычислялся по формуле

$$\alpha = -\frac{\ln T}{l}, \quad \text{которая следует из выражения (1). Здесь } T = I/I_0 \text{ - коэффициент}$$

пропускания света кюветой.

Математическая обработка результатов измерений состоит в подборе таких значений параметров r и m , при которых график функции $\alpha(r, m, \lambda)$ наилучшим образом проходит через экспериментальные точки. Это можно сделать с помощью метода наименьших квадратов.

Трудность решения такой задачи состоит в том, что вычисления занимают очень много времени, так как строгие формулы для фактора эффективности ослабления сферы представляют собой медленно сходящиеся ряды со слагаемыми, имеющими довольно сложный вид [7,8].

Чтобы уменьшить время вычислений, используются приближенные выражения для фактора эффективности ослабления. Известны несколько таких приближений. Каждое из них применимо к определенному классу частиц – малых или больших по сравнению с длиной волны, с малым или большим показателем преломления и т.д.

1) Если частицы малы ($\rho \ll 1$), то для частиц без поглощения

$$Q = \frac{8}{3} \left(\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right)^2 \rho^4, \quad (5)$$

а для поглощающих частиц

$$Q = \frac{24n\kappa}{(n^2 + \kappa^2)^2 + 4(n^2 - \kappa^2) + 4} \rho, \quad (6).$$

2) Для частиц без поглощения и $\rho \leq 1,4$

$$Q = \frac{8}{3} \left(\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right)^2 \rho^4 \left[1 + \frac{6}{5} \rho^2 \frac{n^2 - 2}{n^2 + 2} + \rho^4 \left\{ \frac{3}{175} \frac{n^6 + 41n^4 - 284n^2 + 284}{(n^2 + 2)^2} + \frac{1}{900} \left(\frac{n^2 + 2}{2n^2 + 3} \right)^2 [1,5 + (2n^2 + 3)^2] \right\} \right], \quad (7)$$

Для частиц с комплексным показателем преломления и $\rho \leq 0,8$

$$Q = \frac{24n\kappa}{Z_1} \rho + \left[\frac{4n\kappa}{15} + \frac{20n\kappa}{3Z_2} + 4,8n\kappa \frac{7(n^2 + \kappa^2)^2 + 4(n^2 - \kappa^2 - 5)}{Z_1^2} \right] \rho^3 + \frac{8}{3} \frac{[(n^2 + \kappa^2)^2 + (n^2 - \kappa^2 - 2)]^2 - 36n^2\kappa^2}{Z_1^2} \rho^4, \quad (8)$$

где

$$Z_1 = (n^2 + \kappa^2)^2 + 4(n^2 - \kappa^2) + 4; Z_2 = 4(n^2 + \kappa^2)^2 + 12(n^2 - \kappa^2) + 9.$$

3) Для частиц с $1 < n \leq 1,5$ и $0 \leq \kappa \leq 0,25$ [9]

$$Q = K(m, x)(1 + D), \quad (9)$$

где

$$K(m, x) = 2 - \frac{4 \cos(g)}{x} \exp(-x \operatorname{tg}(g)) \sin(x - g) + 4 \left(\frac{\cos(g)}{x} \right)^2 [\cos(2g) - \exp(-x \operatorname{tg}(g)) \cos(x - 2g)],$$

$$g = \operatorname{arctg} \frac{\kappa}{n-1}, \quad x = 2\rho(n-1).$$

D рассчитывается по определенным формулам при установленных границах x [9].

Таким образом, зная функцию Q , можно найти функцию распределения частиц по размерам. Математическая задача состоит в решении интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода. Каждый способ уменьшения ошибок наиболее эффективен в каком-то конкретном случае, поэтому необходимо иметь представление об их границах применения.

Список литературы: 1. Аппельт Г. Введение в методы микроскопических исследований / Г. аппельт. – М.: Мир, 1959. – 143 с. 2. Цюрупа Н.Н. Практикум по коллоидной химии. / Н. Н. Цюрупа. – М.: Мир, 1966. – 176 с. 3. Ходаков Г.С., Юдкин Ю.Л. Седиментационный анализ высокодисперсных систем. / Г.С. Ходаков, Ю.Л. Юдкин. – М.: Химия, 1981. – 192 с. 4. Беляев С.П., Никифорова Н.К., Смирнов В.В., Щелчков Г.И. Оптико-электронные методы изучения аэрозолей. / С.П. Беляев – М.: Энергоиздат, 1981. – 232 с. 5. Коузов П.А. Основы анализа дисперсного состава промышленных пылей и измельченных материалов / П.А. Коузов. – Л.: Химия, 1974. – 280 с. 6. Архипов В.А. Лазерные методы диагностики гетерогенных потоков / В.А. Архипов. – Томск: Изд-во ун-та, 1987. – 140 с. 7. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами / Г. Ван де Хюлст. – М.: ИЛ, 1961. – 536 с. 8. Kerker M. The scattering of light and other electromagnetic radiation / M. Kerker. – N.Y., London, Academic Press, 1969. – 667 p. 9. Дейрменджан Д. Рассеяние электромагнитного излучения сферическими полидисперсными частицами / Д. Дейрменджан. – М.: Мир, 1971. – 165 с.

Поступила в редколлегию 02.09.2010

УДК 669.094.54:661.87.621:661.668.